Un exemple simple de teoria de pertorbacions

Josep Planelles

September 28, 2017

1 Introducció

Considerem el sistema de dos nivells $H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & -\alpha \end{pmatrix}$, amb autovalors $\varepsilon = \pm\sqrt{\alpha^2+\beta^2} = \pm(\alpha + \frac{\beta^2}{(2\alpha)} - \frac{\beta^4}{(2\alpha)^3} + \dots)$ i autovectors no normalitzats $(1, \pm 1)$.

Anomenem H_0 la diagonal de H i H' la seua extradiagonal. La resolució aproximada pertorbacional arranca de trobar solucions de l'Hamiltonià $H_\lambda = H_0 + \lambda H'$ en el límit $\lambda \to 1$:

$$(H_0 + \lambda H')(C^{(0)} + \lambda C^{(1)} + \lambda^2 C^{(2)} \dots) = (E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} \dots)(C^{(0)} + \lambda C^{(1)} + \lambda^2 C^{(2)} \dots) \tag{1}$$

L'expansió de l'eq. (1) i posterior extracció de factor comú de les diferents potències de λ ens proporciona els diversos ordres de pertorbació:

$$\begin{array}{lcl} \lambda^0 & \to & H_0 C^{(0)} = E^{(0)} C^{(0)} \\ \lambda^1 & \to & H_0 C^{(1)} + H' C^{(0)} = E^{(0)} C^{(1)} + E^{(1)} C^{(0)} \\ \lambda^2 & \to & H_0 C^{(2)} + H' C^{(1)} = E^{(0)} C^{(2)} + E^{(1)} C^{(1)} + E^{(2)} C^{(0)} \\ \lambda^3 & \to & H_0 C^{(3)} + H' C^{(2)} = E^{(0)} C^{(3)} + E^{(1)} C^{(2)} + E^{(2)} C^{(1)} + E^{(3)} C^{(0)} \\ \lambda^4 & \to & H_0 C^{(4)} + H' C^{(3)} = E^{(0)} C^{(4)} + E^{(1)} C^{(3)} + E^{(2)} C^{(2)} + E^{(3)} C^{(1)} + E^{(4)} C^{(0)} \\ \dots & & \end{array} \tag{2}$$

L'equació d'ordre zero (λ^0) té, en particular, l'autovalor $\varepsilon = \alpha$ associat a l'autovector $C^{(0)} = (1, 0)$. Únicament hi ha una altre autovector $C_1 = (0, 1)$, associat amb $\varepsilon = -\alpha$. Per tant, la base completa està composada pels vectors $C^{(0)}$ i C_1.

L'equació a ordre 1 (λ^1) pot ser reescrita $(H_0 - E^{(0)})C^{(1)} = (E^{(1)} - H')C^{(0)}$. Si multipliquem a esquerres per $C^{(0)}$ trobem que $E^{(1)} = C^{(0)} H' C^{(0)}$, que és igual a zero en aquest cas (l'Hamiltonià H' té nuls els elements diagonals). No obstant això, la funció d'ona si que es veu pertorbada. Si tenim en compte que qualsevol pertorbació $C^{(i)}$ és ortogonal a la funció no pertorbada $C^{(0)}$ tenim, en aquest cas, que $C^{(1)}$ haurà de ser be $(0, 0)$ o be $b(0, 1) = bC_1$, on b és una constant a determinar. Com $(0, 0)$ no té sentit com a pertorbació, assumim $C^{(1)} = bC_1$.

Multipliquem ara per l'esquerra l'equació associada amb λ^1 per C_1 obtenint: $C_1\,(H_0 - E^{(0)})\,b\,C_1 = C_1(0 - H')C^{(0)} = -\beta$, cosa que permet aplegar a que,

$$C^{(1)} = \frac{\beta}{2\alpha}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

L'equació a ordre 2 (λ^2) pot ser reescrita $(H_0 - E^{(0)})C^{(2)} = (E^{(1)} - H')C^{(1)} + E^{(2)}C^{(0)}$. Si multipliquem a esquerres per $C^{(0)}$ i reordenem trobem que $E^{(2)} = C^{(0)}(H' - E^{(1)})C^{(1)}$. Com $E^{(1)} = 0$, $C^{(1)} = \frac{\beta}{2\alpha} C_1$ i $C^{(0)} H' C_1 = \beta$, trobem que

$$E^{(2)} = \frac{\beta^2}{2\alpha} \tag{4}$$

De nou el vector $C^{(2)}$ ha de ser ortogonal a la funció no pertorbada $C^{(0)}$, per tant haurà de ser de la forma $b_2 C_1$, on b_2 és una constant a determinar. Per determinar-la, multipliquem per l'esquerra l'equació associada amb λ^2 per C_1 i obtenim:

$$\begin{array}{rcl} C_1(H_0 - E^{(0)}) b_2\, C_1 & = & C_1(E^{(1)} - H')\dfrac{\beta}{2\alpha} C_1 + E^{(2)} C_1 C_0 \\ b_2(2\alpha) & = & 0 + 0 \to b_2 = 0 \end{array} \tag{5}$$

Procedint de manera anàloga amb l'equació a ordre 3 (λ^3) trobem que $E^{(3)} = 0$ mentre que $C^{(3)} = -\frac{\beta^3}{(2\alpha)^3} C_1$. Amb l'equació a ordre 4 (λ^4) trobem que $E^{(4)} = -\frac{\beta^4}{(2\alpha)^3}$ mentre que $C^{(4)} = 0$, etc.

Si comparem les energies trobades als diferents ordres amb l'expansió en sèrie Taylor de l'autovalor exacte $\varepsilon = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$ observem que coincideixen terme a terme.